

PACS numbers: 07.85.Jy, 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.46.Hk, 61.72.Dd, 81.07.Bc

## **Основы многопараметрической диагностики с использованием деформационных зависимостей полной интегральной интенсивности динамической дифракции**

В. В. Лизунов, С. М. Бровчук, А. И. Низкова, В. Б. Молодкин,  
С. В. Лизунова, Б. В. Шелудченко, А. И. Гранкина, И. И. Рудницкая,  
С. В. Дмитриев, Н. Г. Толмачев, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, Н. П. Ирха

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,  
бульв. Акад. Вернадского, 36,  
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

В работе построены полуфеноменологические теоретические модели деформационных зависимостей (ДЗ) полной (брегговской и диффузной) интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД) в кристаллах с дефектами нескольких типов для достаточно высокой степени упругой деформации в различных условиях дифракции. Показана достаточная избирательность чувствительности этих ДЗ ПИИДД к тому типу дефектов, который даёт определяющий вклад в ПИИДД в выбранных условиях дифракции и интервалах изменения степени упругой деформации. Это создаёт основу для решения проблемы диагностики многопараметрических систем путём управления этой избирательностью ДЗ ПИИДД при комбинированном подходе. Приведены результаты практической реализации разработанного подхода.

В роботі побудовано напівфеноменологічні теоретичні моделі деформаційних залежностей (ДЗ) повної (Бреггової і дифузної) інтегральної інтенсивності динамічної дифракції (ПІДД) у кристалах з дефектами декількох типів для достатньо високого ступеня пружної деформації в різних умовах дифракції. Показано достатню вибірковість чутливості цих ДЗ ПІДД до того типу дефектів, що дає визначальний внесок у ПІДД в обраних умовах дифракції та інтервалах зміни ступеня пружної деформації. Це створює основу для розв'язання проблеми діагностики багатопараметричних систем шляхом керування цією вибірковістю ДЗ ПІДД при комбінованому підході. Наведено результати практичної реалізації розробленого підходу.

In a given paper, the models of the deformation dependences (DD) of dynamical diffraction of total (Bragg and diffuse) integral intensity (DDTI) are developed for crystals with several types of defects in the case of sufficiently

high degree of elastic deformation and for the different diffraction conditions. The sufficient selectivity of the DD DDTII sensitivity to that type of defects, which gives determining contribution to DDTII in the chosen diffraction conditions and the intervals of the elastic-deformation variation changes, is established. It constructs the basis for development of the diagnostics problem of multiparametric systems by means of this selectivity control of DD DDTII within the combined approach. The results of the developed practical approach are presented.

**Ключевые слова:** полная интегральная интенсивность динамической дифракции, микродефекты, деформационные зависимости.

(Получено 31 июля 2014 г.)

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] показано, что при изменении условий Лауэ-дифракции от соответствующих приближению толстого кристалла к соответствующим приближению тонкого кристалла и при увеличении степени упругой деформации усиливается деформационная зависимость (ДЗ) наиболее структурно чувствительной величины вклада диффузной составляющей полной интегральной интенсивности динамической дифракции (ПИИДД) (отношения  $R_{id}/R_{ib}$ ). В связи с этим в настоящей статье изложены результаты исследования ДЗ этого отношения при больших значениях макродеформации (упругого изгиба). Проанализирована чувствительность  $R_{id}/R_{ib}$  как к высоким степеням деформации, так и к определяющему типу дефектов. Установлено, что величины вкладов от дефектов разного типа а, следовательно, и формирование избирательности чувствительности к определяющему типу дефектов, дающему максимальный вклад, зависят от величины и от знака макродеформации.

## 2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ДЗ ИИДД В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ДИФРАКЦИИ ДЛЯ ФИКСИРОВАННОЙ ОБЛАСТИ ДЕФОРМАЦИИ

Для интервала изменения параметра эффективной деформации  $BT$  [2] от 1,0 до 1,5 предлагается полуфеноменологическая теоретическая модель (1), описывающая ДЗ ИИДД в кристаллах без дефектов:

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + \alpha BT + \beta B^2 T^2)] \exp(-\gamma B^2 T^2) \times \\ \times \left( 1 + \alpha' \frac{M_0}{r} + \beta' \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{\frac{3}{2}} \gamma' \right]. \quad (1)$$

Здесь, согласно [2],  $r$  — радиус кривизны цилиндрического изгиба

кристалла толщиной  $t$ ,  $B = \frac{\lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_1 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{\text{Hr}}|^2 rd}$ ,  $T = \frac{\pi t |\chi_{\text{Hr}}|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_1}}$ ,

$M_0 = 2T(\chi_{\text{Hi}}/|\chi_{\text{Hr}}|)e^{-M} \sin \theta_{\text{B}} \sin \psi$ ,  $\gamma_0 = \cos(\theta_{\text{B}} + \psi)$ ,  $\gamma_1 = \cos(\theta_{\text{B}} - \psi)$ ,  $\psi$  — угол между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности кристалла,  $\theta_{\text{B}}$  — угол Брэгга,  $\lambda$  — длина волны используемого излучения,  $d = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ,  $a$  — постоянная решётки,  $h, k, l$  — индексы Миллера,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\chi_{\text{Hr}}$  — реальная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла,  $\chi_{\text{Hi}}$  — мнимая часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла,  $\mu_0$  — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения.

Путём сравнения расчётов по теории [2] и по модели (1) для различных условий дифракции получены соответствующие значения для коэффициентов модели (1) (см. формулы (2)–(16) и рис. 1–5).

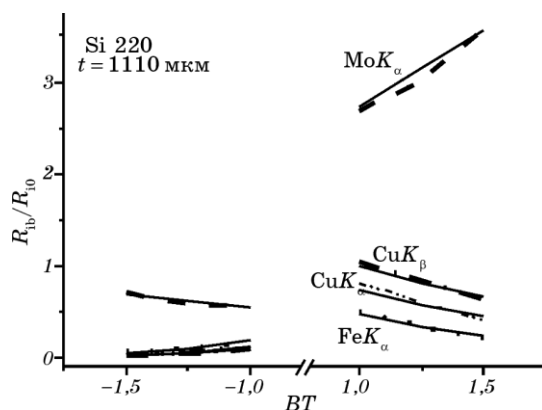
На рисунках 1–5 представлены полученные для различных длин волн рентгеновского излучения ДЗ ИИДД упруго деформированных кристаллов кремния различных толщин. Подбор коэффициентов модели осуществлялся без изменения общего вида модели для разных толщин кристаллов и длин волн излучений. При этом параметры модели, характеризующие отражательную способность кристалла заданной толщины, не зависят от длины волны излучения, а значения параметров модели ДЗ, характеризующих поглощательную способность, зависят от  $\lambda$  и определялись для каждой длины волны излучения отдельно.

ДЗ ИИДД кристалла кремния толщиной  $t = 1110$  мкм, полученные для различных длин волн излучения ( $\text{MoK}_\alpha$ ,  $\text{CuK}_\alpha$ ,  $\text{CuK}_\beta$ ,  $\text{FeK}_\alpha$ ), описываются формулами (2)–(4):

$$R_{\text{ib}} / R_{\text{i0}} = [(1 + 0,986BT + 0,524B^2T^2)] \times \left( 1 - 5,03 \cdot 10^5 \frac{M_0}{r} + 1,159 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 2,016 \cdot 10^9 \right], \quad (2)$$

$$R_{\text{ib}} / R_{\text{i0}} = [(1 + 0,986BT + 0,524B^2T^2)] \times \left( 1 + 1,39 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} - 9,45 \cdot 10^{11} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 8,15 \cdot 10^9 \right], \quad (3)$$

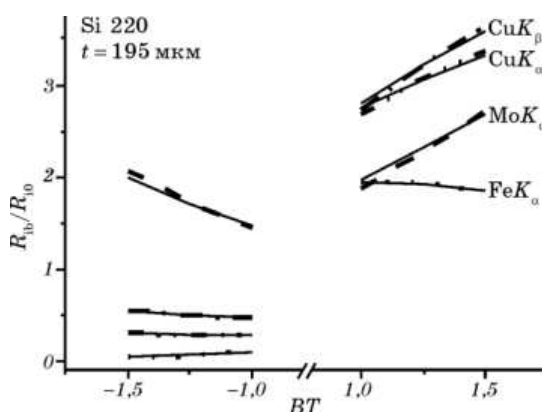
$$R_{\text{ib}} / R_{\text{i0}} = [(1 + 0,986BT + 0,524B^2T^2)] \times \left( 1 + 4,40 \cdot 10^5 \frac{M_0}{r} - 1,10 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 4,44 \cdot 10^9 \right]. \quad (4)$$



**Рис. 1.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(VT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]; штриховая линия — расчёт по модели (2), коэффициент добротности подгонки (КДП) к сплошной линии — 0,26; пунктирная линия — расчёт по модели (2) с КДП = 0,453; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (3) с КДП = 0,232; двойная штрихпунктирная — расчёт по модели (4) с КДП = 0,440.

Результаты расчётов представлены на рис. 1.

ДЗ ИИДД кристалла кремния толщиной  $t = 195$  мкм, полученные для различных длин волн излучения ( $MoK_\alpha$ ,  $CuK_\alpha$ ,  $CuK_\beta$ ,  $FeK_\alpha$ ), описываются формулами (5)–(7):



**Рис. 2.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(VT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]; штриховая линия — расчёт по модели (5) с КДП = 0,0801; пунктирная линия — расчёт по модели (5) с КДП = 0,111; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (6) с КДП = 0,0303; двойная штрихпунктирная — расчёт по модели (7) с КДП = 0,0269.

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,193BT + 0,743B^2T^2)] \exp(-0,049B^2T^2) \times \left( 1 + 1,196 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 4,07 \cdot 10^{11} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 8,8 \cdot 10^8 \right], \quad (5)$$

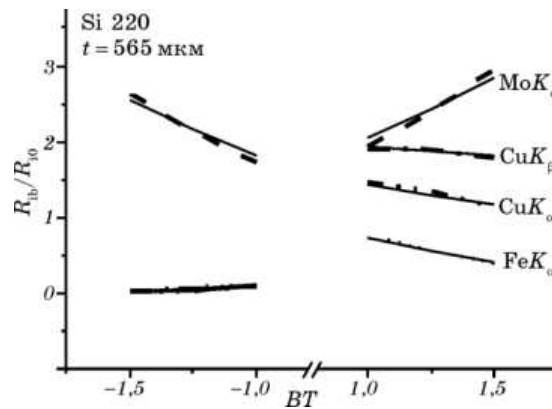
$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,193BT + 0,743B^2T^2)] \exp(-0,049B^2T^2) \times \left( 1 + 3,57 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 6,855 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 3,7 \cdot 10^9 \right], \quad (6)$$

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,193BT + 0,743B^2T^2)] \exp(-0,049B^2T^2) \times \left( 1 + 2,834 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 3,142 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 2,384 \cdot 10^9 \right]. \quad (7)$$

Результаты расчётов представлены на рис. 2.

ДЗ ИИДД кристалла кремния толщиной  $t = 565$  мкм, полученные для различных длин волн излучения ( $MoK_\alpha$ ,  $CuK_\alpha$ ,  $CuK_\beta$ ,  $FeK_\alpha$ ), описываются формулами (8)–(10):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,077BT + 0,879B^2T^2)] \exp(-0,024B^2T^2) \times \left( 1 + 8,18 \cdot 10^5 \frac{M_0}{r} + 2,14 \cdot 10^{11} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 1,548 \cdot 10^9 \right], \quad (8)$$



**Рис. 3.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]; штриховая линия — расчёт по модели (8) с КДП = 0,179; пунктирная линия — расчёт по модели (8) с КДП = 0,189; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (9) с КДП = 0,2; двойная штрихпунктирная — расчёт по модели (10) с КДП = 0,0269.

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,077BT + 0,879B^2T^2)] \exp(-0,024B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 4,755 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 6,214 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 7,255 \cdot 10^9 \right], \quad (9)$$

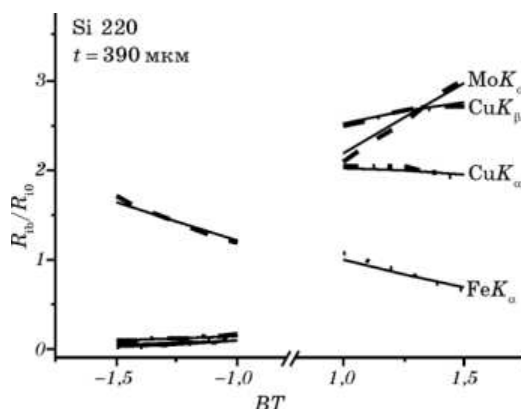
$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,077BT + 0,879B^2T^2)] \exp(-0,024B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 4,755 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 6,214 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 7,255 \cdot 10^9 \right]. \quad (10)$$

Результаты расчётов представлены на рис. 3.

ДЗ ИИДД кристалла кремния толщиной  $t = 390$  мкм, полученные для различных длин волн излучения ( $MoK_\alpha$ ,  $CuK_\alpha$ ,  $CuK_\beta$ ,  $FeK_\alpha$ ), описываются формулами (11)–(13):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,45BT + 0,698B^2T^2)] \exp(-0,038B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 8,593 \cdot 10^5 \frac{M_0}{r} + 2,166 \cdot 10^{11} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 1,32 \cdot 10^9 \right], \quad (11)$$

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,45BT + 0,698B^2T^2)] \exp(-0,0379B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 4,163 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 5,519 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 5,314 \cdot 10^9 \right], \quad (12)$$



**Рис. 4.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]; штриховая линия — расчёт по модели (11) с КДП = 0,097; пунктирная линия — расчёт по модели (11) с КДП = 0,224; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (12) с КДП = 0,0333; двойная штрихпунктирная — расчёт по модели (13) с КДП = 0,0523.

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,45BT + 0,698B^2T^2)] \exp(-0,0379B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 2,933 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 2,536 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 3,785 \cdot 10^9 \right]. \quad (13)$$

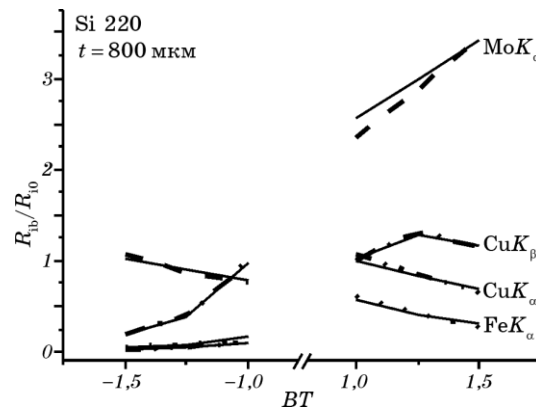
Результаты расчётов представлены на рис. 4.

ДЗ ИИДД кристалла кремния толщиной  $t = 800$  мкм, полученные для различных длин волн излучения ( $MoK_\alpha$ ,  $CuK_\alpha$ ,  $CuK_\beta$ ,  $FeK_\alpha$ ), описываются формулами (14)–(16):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,795BT + 0,56B^2T^2)] \times \\ \times \left( 1 + 1,44 \cdot 10^5 \frac{M_0}{r} - 9,3 \cdot 10^{10} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 1,295 \cdot 10^9 \right], \quad (14)$$

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,795BT + 0,56B^2T^2)] \times \\ \times \left( 1 + 2,935 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 2,33 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 8,305 \cdot 10^9 \right], \quad (15)$$

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,795BT + 0,56B^2T^2)] \times \\ \times \left( 1 + 1,507 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 4,0 \cdot 10^{11} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 5,164 \cdot 10^9 \right]. \quad (16)$$



**Рис. 5.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]; штриховая линия — расчёт по модели (14) с КДП = 0,233; пунктирная линия — расчёт по модели (14) с КДП = 0,524; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (15) с КДП = 0,09; двойная штрихпунктирная — расчёт по модели (16) с КДП = 0,6.

Результаты расчётов представлены на рис. 5.

Таким образом, построены полуфеноменологические теоретические модели ДЗ ИИДД упруго деформированных кристаллов кремния различных толщин в различных условиях дифракции. Полученные результаты показывают, что построение моделей следует выполнять отдельно для каждого из узких интервалов изменения эффективной деформации ( $BT$ ) и заданных условий дифракции.

### 3. ДЗ ПИИДД ДЛЯ РАЗНЫХ ТИПОВ ДЕФЕКТОВ

Ниже обсуждаются полуфеноменологические теоретические модели ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами для различных условий дифракции и результаты расчётов, представленные соответственно формулами (17)–(20) и рис. 6–12.

Апробированным выше методом определены вид моделей ДЗ ИИДД (17), (18) и коэффициенты для 220 Лауэ-отражения  $MoK_{\alpha}$ - и  $FeK_{\alpha}$ -излучений от идеального монокристалла Si толщиной  $t = 488$  мкм и углом между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности кристалла  $\psi = 2,05^{\circ}$ .

При этом ДЗ ИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $|BT| \leq 1$  описывается формулой (17):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,58BT + 0,61B^2T^2)] \exp(-0,33B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 3,8 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + \frac{M_0^2}{r^2} 2,95 \cdot 10^{12} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right| 2,12 \cdot 10^{10} \right]. \quad (17)$$

Результаты расчётов представлены на рис. 6.

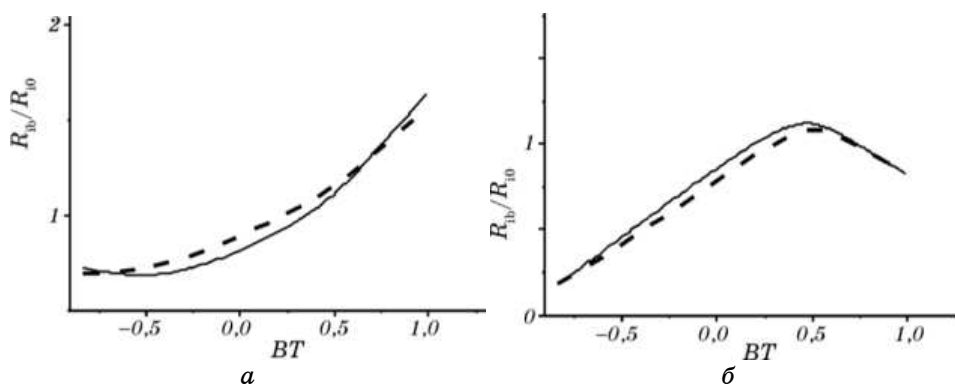
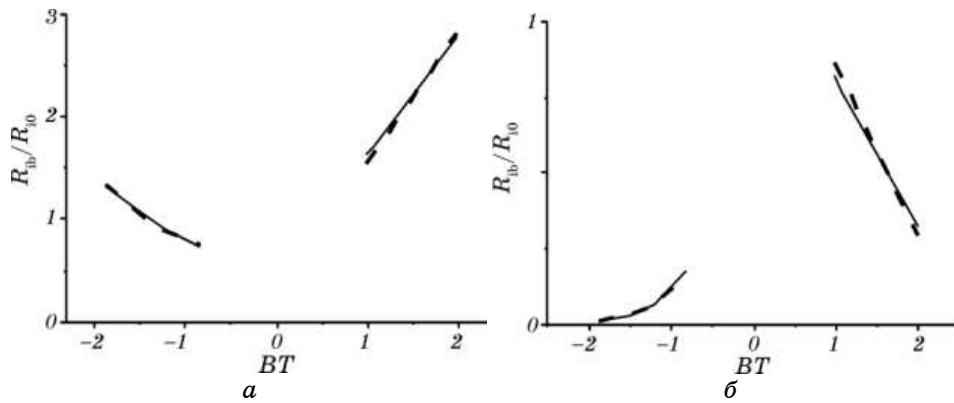


Рис. 6. ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]. Штриховые линии — расчёт по модели (17): излучение  $MoK_{\alpha}$ , КДП = 0,143 (а); излучение  $FeK_{\alpha}$ , КДП = 0,114 (б).





**Рис. 7.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]. Штриховые линии — расчёт по модели (18): излучение  $MoK_{\alpha}$ , КДП = 0,0275 (а); излучение  $FeK_{\alpha}$ , КДП = 0,134 (б).

ДЗ ИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $1 \leq |BT| \leq 2$  описывается формулой (18):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,5BT + 0,545B^2T^2)] \exp(-0,273\sqrt{|BT|}) \times \\ \times \left( 1 + 4,65 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + \frac{M_0^2}{r^2} 5,6 \cdot 10^{12} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{3/2} 2,12 \cdot 10^{10} \right]. \quad (18)$$

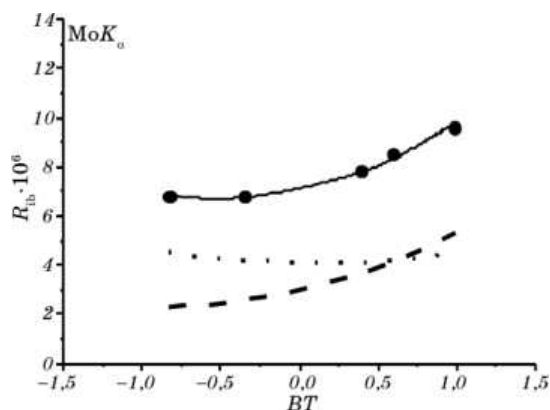
Результаты расчётов представлены на рис. 7.

Для определения коэффициентов диффузных составляющих моделей (19) и (20) использован эксперимент работы [3] для кристалла кремния, содержащего дискообразные кластеры  $SiO_2$  и дислокационные петли. ДЗ ПИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $|BT| \leq 1$  описывается формулой (19):

$$R_{ib} = 3,37 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,58BT + 0,61B^2T^2)] \exp(-0,33B^2T^2) \times \\ \times \left( 1 + 3,8 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 2,95 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right| 2,12 \cdot 10^{10} \right] + \\ + 4,04 \cdot 10^{-6} [(1 - 0,03BT + 0,14B^2T^2)] \times \\ \times \left( 1 + 3,8 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 2,95 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right| 2,12 \cdot 10^{10} \right]. \quad (19)$$

Результаты расчётов представлены на рис. 8.

ДЗ ПИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $1 \leq |BT| \leq 2$  описывается формулой (20):



**Рис. 8.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ . Сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (19), КДП к экспериментальной ДЗ (маркёры) = 0,0167; штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД; пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД.

$$\begin{aligned}
 R_{ib} = & 3,37 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,5BT + 0,545B^2T^2)] \exp(-0,273\sqrt{|BT|}) \times \\
 & \times \left( 1 + 4,65 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 5,6 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{\frac{3}{2}} 2,12 \cdot 10^{10} \right] + \\
 & + 4,04 \cdot 10^{-6} [(1 - 0,03B^2T^2)] \times \\
 & \times \left( 1 + 4,65 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 5,6 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right|^{\frac{3}{2}} 2,12 \cdot 10^{10} \right].
 \end{aligned} \quad (20)$$

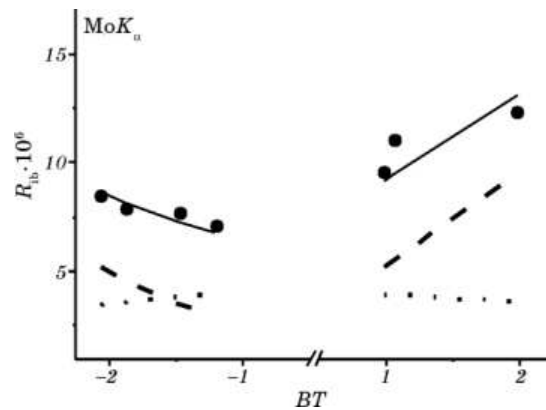
Результаты расчётов представлены на рис. 9.

При использовании модели (19) для интервала деформаций  $0,75 \leq BT \leq 1,5$ , а также модели, полученной в работе [1] для интервала деформаций  $|BT| \leq 0,75$ , исследованы возможности разделения вкладов от различных дефектов при условии, что величины ПИИДД неизогнутого монокристалла Si, содержащего дефекты одного или другого типа, одинаковы.

Параметры дефектной структуры (кластеров и дислокационных петель) исследуемого кристалла кремния представлены в табл. 1.

В таблице 2 представлены значения ПИИДД, а также её когерентной и диффузной составляющих, рассчитанные для 220 асимметричного ( $\psi = 2,05^\circ$ ) Лауэ-отражения  $MoK_\alpha$ -излучения для монокристалла кремния толщиной  $t = 488$  мкм при наличии в нем одного из двух указанных в табл. 1 типов дефектов.

На рисунке 10 представлены ДЗ ПИИДД, рассчитанные по моде-



**Рис. 9.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ . Сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (20); КДП к экспериментальной ДЗ (маркёры) = 0,117; штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД; пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД.

ли (19), при использовании значений  $R_i^{coh}$  и  $R_i^{dif}$  из табл. 2.

Из рисунка 10 видно, что в области отрицательных деформаций ПИИДД кристалла, содержащего кластеры, выше, чем ПИИДД кристалла, содержащего дислокационные петли; при  $VT = -0,75$   $R_{ib}^{cl.} / R_{ib}^{sm.loops} = 1,20$ . При положительных деформациях, наоборот, ПИИДД кристалла, содержащего кластеры, меньше, чем ПИИДД кристалла, содержащего дислокационные петли; при  $VT = +0,75$   $R_{ib}^{cl.} / R_{ib}^{sm.loops} = 0,91$ .

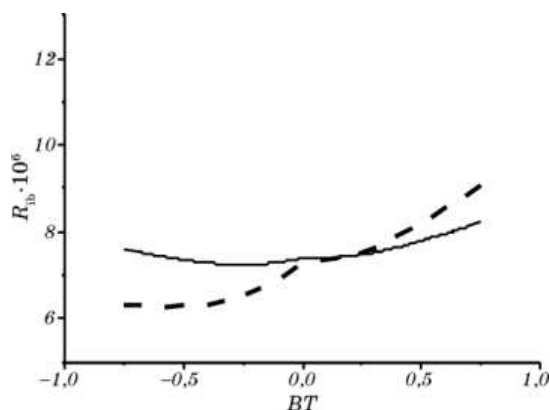
На рисунке 11 представлены ДЗ ПИИДД, рассчитанные по модели (20), при использовании значений  $R_i^{coh}$  и  $R_i^{dif}$  из табл. 2.

**ТАБЛИЦА 1.** Средние размеры ( $R$ ,  $h$ ) и концентрации ( $c$ ) дискообразных кластеров  $SiO_2$  и мелких дислокационных петель.

$R_{кл.}, \text{мкм}$	$h_{кл.}, \text{мкм}$	$c_{кл.} \cdot 10^{16}$	$R_{м.п.}, \text{мкм}$	$c_{м.п.} \cdot 10^{10}$
1	0,02	9,42	0,02	1,38

**ТАБЛИЦА 2.** Полная интегральная интенсивность динамической дифракции исследуемого кристалла, а также её когерентная и диффузная составляющие.

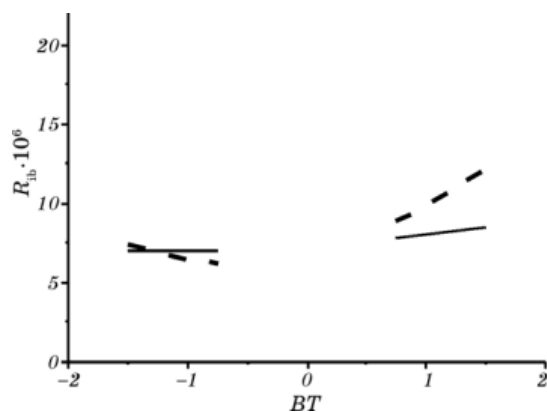
Дефекты	$R_i \cdot 10^6$	$R_i^{coh} \cdot 10^6$	$R_i^{dif} \cdot 10^6$
Кластеры $SiO_2$	7,44	1,1	6,13
Мелкие дислокационные петли	7,44	4,33	3,11



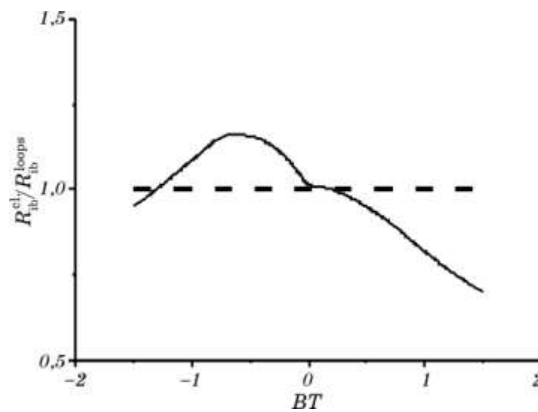
**Рис. 10.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ . Сплошная линия — ДЗ ПИИДД для кластеров; штриховая линия — ДЗ ПИИДД для мелких дислокационных петель.

На рисунке 12 приведена ДЗ отношения ПИИДД кристалла, содержащего кластеры, к ПИИДД кристалла, содержащего дислокационные петли, в интервале изменения деформации  $|VT| < 1,5$ .

Из рисунков 11 и 12 видно, что ДЗ ПИИДД достаточно чувствительны к типу дефектов, а именно, в области отрицательных деформаций при увеличении модуля деформации в интервале  $0,75 \leq |VT| \leq 1,5$  отношение ПИИДД, рассчитанной для кристалла, содержащего кластеры, к ПИИДД кристалла, содержащего дислокационные петли, уменьшается от  $\approx 1,2$  (при  $VT = -0,75$ ) до  $0,95$  (при  $VT = -1,5$ ). При положительных деформациях в интервале



**Рис. 11.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ . Сплошная линия — ДЗ ПИИДД для кластеров; штриховая линия — ДЗ ПИИДД для мелких дислокационных петель.



**Рис. 12.** ДЗ отношения величины ПИИДД упруго изогнутого кристалла  $R_{ib}^{cl}$ , рассчитанной для кластеров, к ПИИДД, рассчитанной для дислокационных петель  $R_{ib}^{loops}$ .

$0,75 \leq |BT| \leq 1,5$  ПИИДД, рассчитанная для кристалла, содержащего кластеры, продолжает уменьшаться с увлечением  $BT$ , и при  $BT = 1,5$   $R_{ib}^{cl} / R_{ib}^{sm.loops} = 0,7$ . Таким образом, в исследованном интервале изменения макродеформаций относительное изменение вкладов в ПИИДД дефектов разного типа при изменении степени макродеформации может достигать 50%, что и обеспечивает возможность выполнения многопараметрической диагностики.

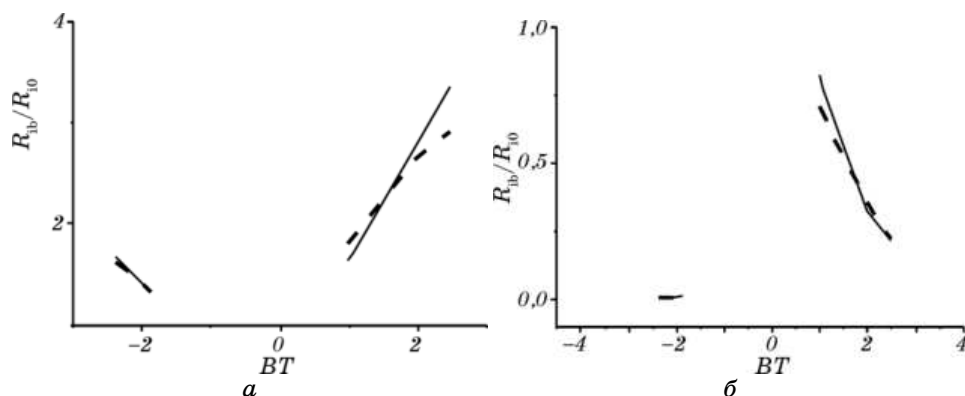
#### 4. МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА ДЕФЕКТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЗ ПИИДД

Ниже обсуждаются полуфеноменологические теоретические модели и результаты расчётов, представленные соответственно формулами (21)–(24) и рис. 13–20.

Апробированным выше методом найден вид моделей ДЗ ИИДД (21), (22) и коэффициенты для 220 Лауэ-отражения  $MoK_{\alpha}$ - и  $FeK_{\alpha}$ -излучений от идеального монокристалла Si толщиной  $t = 488$  мкм и углом между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности кристалла  $\psi = 2,05^\circ$  для макродеформаций  $2,0 \leq |BT| \leq 2,5$  и  $2,5 \leq |BT| \leq 4,0$ . ДЗ ИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $2,0 \leq |BT| \leq 2,5$  описывается формулой (21):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 + 0,845BT + 1,155B^2T^2)] \exp(-0,5|BT|) \times \left( 1 + 4,97 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + \frac{M_0^2}{r^2} 6,64 \cdot 10^{12} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right| 1,079 \cdot 10^7 \right]. \quad (21)$$

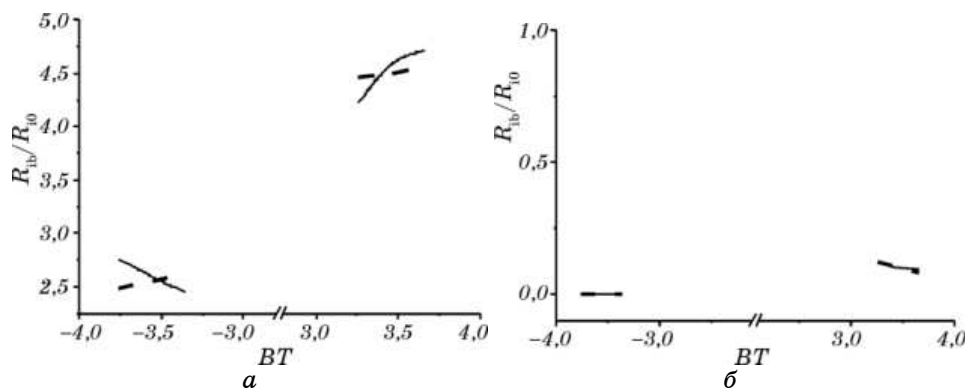
Результаты расчётов представлены на рис. 13.



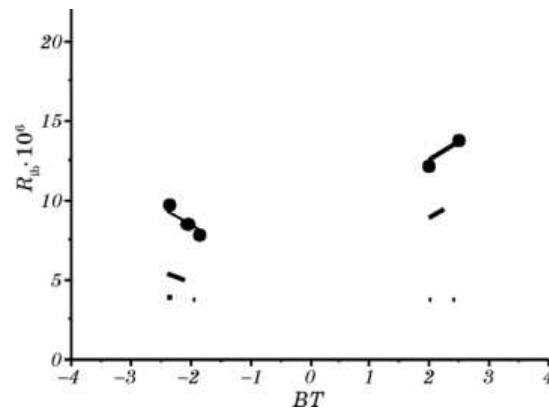
**Рис. 13.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]. Штриховая линия — расчёт по модели (21): излучение  $MoK_{\alpha}$ , КДП к сплошной линии = 0,123 (а); излучение  $FeK_{\alpha}$ , КДП к сплошной линии = 0,146.

ДЗ ИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $2,5 \leq |BT| \leq 4,0$  описывается формулой (22):

$$R_{ib} / R_{i0} = [(1 - 1,27BT + 2,99|BT|)] \exp(-0,31|BT|) \times \left( 1 + 3,65 \cdot 10^8 \frac{M_0}{r} + \left| \frac{M_0}{r} \right| 3,65 \cdot 10^8 \right) \exp \left[ -\sqrt{\left| \frac{M_0}{r} \right|} 1,152 \cdot 10^4 \right]. \quad (22)$$



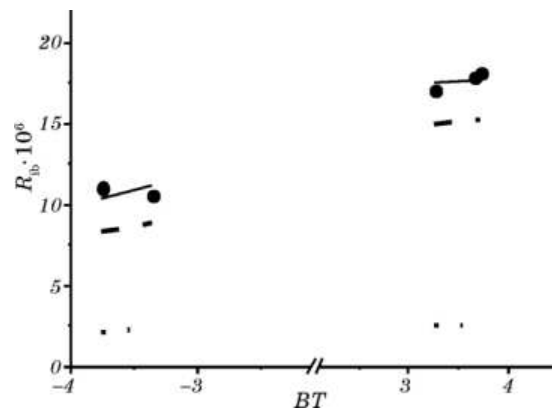
**Рис. 14.** ДЗ ИИДД упруго изогнутого идеального кристалла, нормированные на ИИДД неизогнутого идеального кристалла,  $R_{ib}(BT)/R_{i0}$ . Сплошные линии рассчитаны по теории [2]. Штриховая линия — расчёт по модели (22): излучение  $MoK_{\alpha}$ , КДП к сплошной линии = 0,113 (а); излучение  $FeK_{\alpha}$ , КДП к сплошной линии = 0,220.



**Рис. 15.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ ; сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (23), КДП к экспериментальной ДЗ (маркеры) = 0,032; штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД  $R_{ib}^{coh}(VT)$ , пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД  $R_{ib}^{dif}(VT)$ .

Результаты расчётов представлены на рис. 14.

Для определения коэффициентов ДЗ диффузных составляющих ПИИДД моделей (23) и (24) использован эксперимент работы [3]. ДЗ ПИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $2,0 \leq |VT| \leq 2,5$  описывается формулой (23):



**Рис. 16.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ ; сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (24), КДП к экспериментальной ДЗ (маркеры) = 0,0466; штриховая линия — ДЗ когерентной составляющей ПИИДД  $R_{ib}^{coh}(VT)$ , пунктирная линия — ДЗ диффузной составляющей ПИИДД  $R_{ib}^{dif}(VT)$ .

$$\begin{aligned}
R_{\text{ib}} = & 3,37 \cdot 10^{-6} [(1 + 0,845BT + 1,155B^2T^2)] \exp(-0,5|BT|) \times \\
& \times \left( 1 + 4,97 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 6,64 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right| 1,079 \cdot 10^7 \right] + \\
& + 4,04 \cdot 10^{-6} [(1 - 0,03BT + 0,62B^2T^2)] \exp(-0,645|BT|) \times \\
& \times \left( 1 + 4,97 \cdot 10^6 \frac{M_0}{r} + 6,64 \cdot 10^{12} \frac{M_0^2}{r^2} \right) \exp \left[ - \left| \frac{M_0}{r} \right| 1,079 \cdot 10^7 \right].
\end{aligned} \tag{23}$$

Результаты расчётов представлены на рис. 15.

ДЗ ПИИДД кристалла кремния для макродеформаций  $2,5 \leq |BT| \leq 4,0$  описывается формулой (24):

$$\begin{aligned}
R_{\text{ib}} = & 3,37 \cdot 10^{-6} [(1 - 1,27BT + 2,99|BT|)] \exp(-0,31|BT|) \times \\
& \times \left( 1 + 3,65 \cdot 10^8 \frac{M_0}{r} + 3,66 \cdot 10^8 \left| \frac{M_0}{r} \right| \right) \exp \left[ - \sqrt{\left| \frac{M_0}{r} \right|} 1,152 \cdot 10^4 \right] + \\
& + 4,04 \cdot 10^{-6} [(1 - 0,47BT + 0,54|BT|)] \exp(-0,39|BT|) \times \\
& \times \left( 1 + 3,65 \cdot 10^8 \frac{M_0}{r} + 3,66 \cdot 10^8 \left| \frac{M_0}{r} \right| \right) \exp \left[ - \sqrt{\left| \frac{M_0}{r} \right|} 1,152 \cdot 10^4 \right].
\end{aligned} \tag{24}$$

Результаты расчётов представлены на рис. 16.

Параметры дефектов трёх типов одновременно присутствующих в образце, полученные путём совместного фитирования с использованием формул (19), (20), (23), (24) всех исследованных участков ДЗ ПИИДД, полученной в работе [3], представлены в первой строке табл. 3.

В таблице 4 представлены значения ПИИДД, а также её когерентной и диффузной составляющих, рассчитанные для 220 асимметричного ( $\psi = 2,05^\circ$ ) Лауэ-отражения  $\text{MoK}_\alpha$ -излучения для монокристалла кремния толщиной  $t = 488$  мкм при наличии в нём трёх одновременно или одного из них типов дефектов с указанными в табл. 3 значениями их параметров.

Результаты расчётов, представленные в табл. 4 и на рис. 17–20, иллюстрируют обусловленные дисперсионным механизмом влияния микро- и наноразмерных дефектов, а также макродеформаций на картину многократного рассеяния как явление возникновения уникальной чувствительности полной интегральной интенсивности динамической дифракции к этим искажениям, так и явление изменения избирательности чувствительности ДЗ ПИИДД к разным типам дефектов при изменении условий дифракции и областей варьирования величины макродеформации, что и обеспечило возможность выполнения многопараметрической диагностики.



**ТАБЛИЦА 3.** Средние размеры и концентрации дискообразных кластеров SiO<sub>2</sub>, больших и малых дислокационных петель.

$R_{кл.}, \text{мкм}$	$h_{кл.}, \text{мкм}$	$c_{кл.} \cdot 10^{14}$	$R_{б.п.}, \text{мкм}$	$c_{б.п.} \cdot 10^{15}$	$R_{м.п.}, \text{мкм}$	$c_{м.п.} \cdot 10^{10}$	$N$ дефектной структуры
0,45	0,0116	2,24	1,7	0,364	0,0129	8,42	1
0,45	0,0116	2,24					2
			1,7	0,364			3
					0,0129	8,42	4

**ТАБЛИЦА 4.** Значения ПИИДД  $R_i$ , а также её когерентной  $R_i^{\text{coh}}(BT)$  и диффузной  $R_i^{\text{dif}}(BT)$  составляющих для 220 асимметричного ( $\psi = 2,05^\circ$ ) Лауэ-отражения MoK<sub>α</sub>-излучения для монокристалла кремния толщиной  $t = 488$  мкм. Расчёты  $R_i$ ,  $R_i^{\text{coh}}(BT)$  и  $R_i^{\text{dif}}(BT)$  выполнены при наличии в нем трёх типов дефектов (дефектная структура 1 в табл. 3), только кластеров SiO<sub>2</sub> в форме дисков (дефектная структура 2 в табл. 3), только больших петель (дефектная структура 3 в табл. 3) или только мелких петель (дефектная структура 4 в табл. 3).

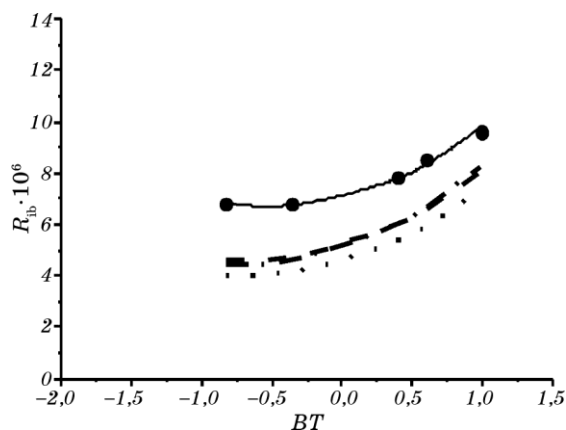
Дефектные структуры	$R_i \cdot 10^6$	$R_i^{\text{coh}} \cdot 10^6$	$R_i^{\text{dif}} \cdot 10^6$
1	7,42	3,37	4,04
2	5,65	3,88	1,76
3	5,03	3,83	1,2
4	5,65	4,37	1,27

Из рисунка 19 видно, что в области положительных деформаций ДЗ ПИИДД избирательно чувствительна к мелким дислокационным петлям. ДЗ ПИИДД, рассчитанная в этой области для мелких дислокационных петель, совпадает с экспериментальной ДЗ, т.е. параметры мелких дислокационных петель могут быть точно определены в этой области деформаций.

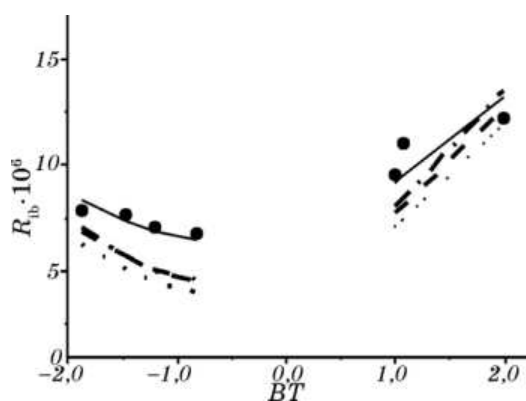
Из рисунка 20 видно, что в области отрицательных деформаций ДЗ ПИИДД избирательно чувствительна к кластерам. ДЗ ПИИДД, рассчитанная в этой области для кластеров, совпадает с экспериментальной ДЗ, т.е. параметры кластеров могут быть точно определены в этой области деформаций.

В то же время из рис. 20 видно, что в области положительных деформаций ДЗ ПИИДД избирательно чувствительна к крупным дислокационным петлям. ДЗ ПИИДД, рассчитанная в этой области для крупных дислокационных петель, совпадает с экспериментальной ДЗ, т.е. параметры крупных дислокационных петель могут быть точно определены в этой области деформаций.

Следует отметить, что значения параметров дефектов, приведён-

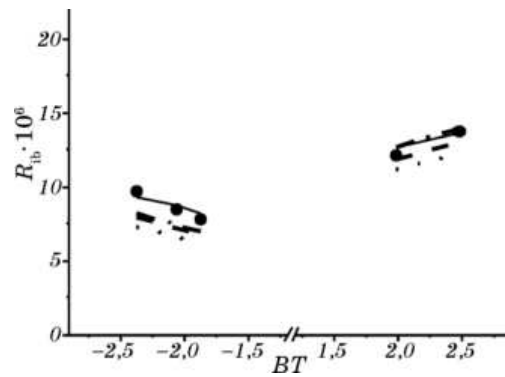


**Рис. 17.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ ; сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (19), КДП к экспериментальной ДЗ (маркёры) = 0,0167; штриховая линия — расчёт по модели (19) в предположении, что в образце есть только кластеры; пунктирная линия — расчёт по модели (19) в предположении, что в образце есть только большие петли; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (19) в предположении, что в образце есть только мелкие петли.



**Рис. 18.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(VT)$ ; сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (20), КДП к экспериментальной ДЗ (маркёры) = 0,122; штриховая линия — расчёт по модели (20) в предположении, что в образце есть только кластеры; пунктирная линия — расчёт по модели (20) в предположении, что в образце есть только большие петли; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (20) в предположении, что в образце есть только мелкие петли.

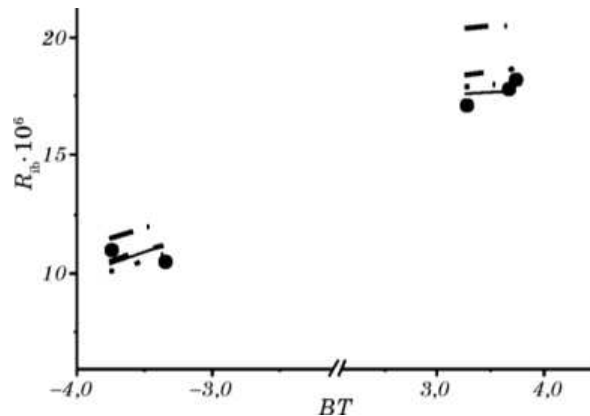
ные в табл. 3, совпадают с их значениями, полученными независимыми методами в работе [4].



**Рис. 19.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ . Сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (23), КДП к экспериментальной ДЗ (маркёры) = 0,0327; штриховая линия — расчёт по модели (23) в предположении, что в образце есть только кластеры; пунктирная линия — расчёт по модели (23) в предположении, что в образце есть только большие петли; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (23) в предположении, что в образце есть только мелкие петли.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе созданы основы многопараметрической диагностики с использованием ДЗ ПИИДД. Построены полуфеноменологические



**Рис. 20.** ДЗ ПИИДД упруго изогнутого кристалла с дефектами  $R_{ib}(BT)$ . Сплошная линия — ДЗ ПИИДД, рассчитанная по модели (24), КДП к экспериментальной ДЗ (маркёры) = 0,0466; штриховая линия — расчёт по модели (24) в предположении, что в образце есть только кластеры; пунктирная линия — расчёт по модели (24) в предположении, что в образце есть только большие петли; штрихпунктирная линия — расчёт по модели (24) в предположении, что в образце есть только мелкие петли.

теоретические модели ДЗ ПИИДД в кристаллах с дефектами нескольких типов для различных степеней упругой деформации в различных условиях дифракции. Проанализирована чувствительность величины вклада диффузной составляющей ПИИДД как к степени деформации, так и к определяющему типу дефектов. Установлено, что формирование избирательности чувствительности к определяющему типу дефектов, дающему максимальный вклад, зависит как от условий дифракции, так и от величины и от знака макродеформации, что обеспечило возможность решения проблемы диагностики многопараметрических систем путём управления этой избирательностью ДЗ ПИИДД при комбинированном подходе.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Лизунов, С. М. Бровчук, А. И. Низкова, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Б. В. Шелудченко, А. И. Гранкина, И. И. Рудницкая, С. В. Дмитриев, Н. Г. Толмачев, Р. В. Лехняк, Л. Н. Скапа, Н. П. Ирха, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 9: 1271 (2014).
2. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta Cryst. A*, **33**, Iss. 2: 311 (1977).
3. L. I. Datsenko and E. N. Kislovskii, *physica status solidi (a)*, **25**, Iss. 2: 551 (1974).
4. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак, В. Ф. Мачулин, В. П. Кладько, И. В. Прокопенко, Р. Н. Кютт, Е. Н. Кисловский, С. И. Олиховский, Е. В. Первак, И. М. Фодчук, А. А. Дышеков, Ю. П. Хапачев, *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).

## REFERENCES

1. V. V. Lizunov, S. M. Brovchuk, A. I. Nizkova, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, B. V. Sheludchenko, A. I. Grankina, I. I. Rudnitska, S. V. Dmitriev, M. G. Tolmachev, R. V. Lekhnyak, L. M. Skapa, and N. P. Irkha, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 9: 1271 (2014) (in Russian).
2. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta Cryst. A*, **33**, Iss. 2: 311 (1977).
3. L. I. Datsenko and E. N. Kislovskii, *physica status solidi (a)*, **25**, Iss. 2: 551 (1974).
4. V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, A. P. Shpak, V. F. Machulin, V. P. Klad'ko, I. V. Prokopenko, R. N. Kyutt, E. N. Kislovskiy, S. I. Olikhovskiy, E. V. Pervak, I. M. Fodchuk, A. A. Dyshekov, and Yu. P. Khapachev, *Difraktometriya Nanorazmernykh Defektov i Geterosloyov Kristallov* [Diffractionmetry of Nanoscale Defects and Heterolayers of Crystals] (Kiev: Akadempriodika: 2005) (in Russian).